

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРЕБІГУ КАТАЛІТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ

Мирошніченко Ю. В., студентка; Рибалов О. О., доцент

Сучасний етап розвитку природоохоронних технологій характеризується активним інтересом до нанотехнологій, тобто таких, які дозволяють працювати з речовинами на рівні окремих молекул і атомів. Це потребує розробки нових підходів в області моделювання реальних фізичних процесів в нанооб'єктах та пошуку ефективних методів дослідження побудованих моделей. Висока складність та обмеженість у часі стають причиною здійснення досліджень не на реальних об'єктах, а на математичних моделях.

Вище викладені проблеми виникають при дослідженнях в області каталізу - одного із високоефективних процесів, що застосовується для очищення відхідних газів промисловості.

Специфіка цієї області полягає у тому, що каталітичні процеси відбуваються на нанорівні, з чого випливає їх складність, висока вартість побудови експериментальних установок та суттєві витрати часу на такі дослідження. Найголовнішою проблемою при цьому є неможливість гарантувати їх успішність. За таких умов найбільш доцільним стає моделювання таких явищ за допомогою математичних моделей.

Математична модель – це система математичних співвідношень, які описують об'єкт, процес чи явище, що досліджується; “еквівалент” об'єкту, що відображає в математичній формі його найважливіші властивості – закони, яким він підкорюється, зв'язки, які притаманні його складовим частинам.

На сьогодні пріоритетними є дослідження перебігу каталітичних процесів за допомогою комп'ютерного математичного моделювання.

Сутність комп'ютерного моделювання полягає в заміні вихідного технологічного об'єкту його «образом» - математичною моделлю – і в подальшому вивченні цієї моделі за допомогою реалізованих на комп'ютерах обчислювально-логічних алгоритмів. Цей метод поєднує в собі переваги як теорії, так і експерименту.

Робота не з самим об'єктом (явищем, процесом), а з його моделлю дає можливість відносно швидко і без істотних витрат досліджувати його властивості і поведінку в будь-яких ситуаціях (переваги теорії). В той же час обчислювальні (імітаційні) експерименти з моделями об'єктів дозволяють детально вивчати об'єкти достатньо повно, що є недоступним для теоретичних підходів (переваги експерименту).

Таким чином комп'ютерне математичне моделювання при дослідженні перебігу каталітичних процесів є досить ефективним, адже воно дає можливість досліднику експериментувати з об'єктами в тих випадках, коли робити це на реальному об'єкті практично неможливо або недоцільно.

Сучасні технології у промисловому виробництві: матеріали науково-технічної конференції викладачів, співробітників, аспірантів і студентів факультету технічних систем та енергоефективних технологій, м. Суми, 23-26 квітня 2013 р.: у 2-х ч. / Ред.кол.: О.Г. Гусак, В.Г. Євтухов. - Суми : СумДУ, 2013. - Ч.2. - С. 183.